

9. Modificació de la funció de Jastrow

Al capítol 7 s'ha introduït el backflow modificant la funció d'ona total $\Psi_A(\vec{R})$ a través d'un canvi en les coordenades de la part antisimètrica $\Psi_F(\vec{R})$:

$$\Psi_A(\vec{R}) = \Psi_F(\vec{\tilde{R}}) \cdot \Psi_S(\vec{R}) \quad (9.1)$$

amb:

$$\vec{\tilde{R}} = \vec{R} + C \frac{\vec{\nabla} \Psi_S(\vec{R})}{\Psi_S(\vec{R})} \quad (9.2)$$

Aquest canvi pot entendre's senzillament com un mètode per a millorar variacionalment la funció d'ona. Des d'aquest punt de vista i un cop escrita la funció $\Psi_A(R, \tau)$ la via per a construir la correcció no és única. Anomenem δr_i^a al canvi introduït en cada component a de les coordenades de cadascuna de les partícules i . Hi ha dues possibilitats: si la correcció δr_i^a s'introdueix en els arguments de Ψ_F , com s'ha fet abans, s'obtenen els orbitals modificats que donen lloc a les correlacions de backflow. La segona via és introduir aquestes modificacions en els arguments de la funció simètrica Ψ_S . D'aquesta manera s'obté una funció de Jastrow en que les coordenades ja no són les posicions reals, sinó unes noves posicions: $\tilde{r}_i^a = r_i^a + \delta r_i^a$

$$\delta r_i^a = 2\tau \frac{\nabla_i^a \Psi_F}{\Psi_F} = \tau F_F^a(i) \quad (9.3)$$

$$\tilde{r}_i^a = r_i^a + \tau F_F^a(i) \quad (9.4)$$

A l'apèndix F s'hi fa la deducció detallada de l'efecte que té aquesta correcció sobre les components de la força i l'energia. Les expressions que se'n dedueixen són vàlides quan la funció antisimètrica que dóna lloc al terme $F_F^a(i)$ és el determinant de Slater.

Així com quan s'aplica aquest mètode a la funció d'ona fermiònica el que s'aconsegueix és modificar la superfície nodal, introduint-lo d'aquesta manera no s'altera la posició dels nodes. Ara bé, com més proper al node estigui el walker tant major serà la

correcció introduïda en les coordenades de cadascuna de les partícules, ja que aprop del node el terme $F_F^a(i)$ creix molt.

La funció de guia.

La permanència dels nodes de Ψ_F representa un inconvenient, i és que en ells la força de *drift* divergeix. Per evitar topar directament amb les singularitats es substitueix Ψ_F per una nova funció Ψ_g que s'anomenarà funció de guia. La funció de guia no és més que una modificació de Ψ_F que evita els zeros, però que coincideix amb ella a distàncies prou grans del node.

En eliminar la singularitat, la introducció de la funció de guia aconsegueix evitar l'aparició d'excessius pics en els càlculs de l'energia, que són deguts a la proximitat d'algun *walker* als nodes de Ψ_F . Aquest fet ha estat molt evident en els resultats dels càlculs: la correcció a la funció de Jastrow sense funció de guia dóna lloc a l'aparició freqüent de valors molt alts en l'energia. Aquestes fortes oscil·lacions augmenten molt la variància, i fan imprescindible introduir algun mecanisme per a reduir-la. És per això que tots els resultats obtinguts amb la funció de Jastrow modificada inclouen Ψ_g .

Usant Ψ_g les noves coordenades s'escriuen:

$$\tilde{r}_i^a = r_i^a + \tau F_g^a(i) = r_i^a + \tau 2 \frac{\nabla_i^a \Psi_g}{\Psi_g} \quad (9.5)$$

I per a cada expressió concreta de Ψ_g s'obindrà la corresponent expressió de $F_g^a(i)$ i d'energia cinètica, que cal deduir en cada cas, ja que apareixen termes de la forma $\frac{\partial \tilde{r}_j^b}{\partial r_i^a}$ i

$$\frac{\partial^2 \tilde{r}_j^b}{\partial r_i^{a^2}}.$$

La tria de la funció de guia és una mica arbitrària. Se li demana a aquesta funció que no s'anul·li sobre els nodes de Ψ_F i que la força que se'n deriva sigui una funció contínua. Pot imposar-se també la condició de continuïtat sobre les derivades de la força, però en el cas aquí estudiat això no s'ha fet.

S'ha triat una funció de guia de la forma:

$$\Psi_g(r) = \begin{cases} \Psi_F(r) & \Psi_F(r) \geq a \\ \frac{a}{2} \left(1 + \frac{\Psi_F^2(r)}{a^2} \right) & \Psi_F(r) < a \end{cases} \quad (9.6)$$

En aquest cas les noves coordenades són:

$$\tilde{r}_i^a = r_i^a + \tau F_g^a(i) \quad (9.7)$$

$$F_g^a(i) = \begin{cases} F_A^a(i) & \Psi_A \geq a \\ 2 \frac{(\Psi_A)^2}{a^2 + (\Psi_A)^2} F_A^a(i) & \Psi_A < a \end{cases} \quad (9.8)$$

El càlcul de les corresponents expressions per a l'energia cinètica i la força són a l'apèndix F.

Ara hi ha dues constants que cal ajustar: τ i a .

S'ha observat que el valor de τ ha de ser sempre petit, de l'ordre de les centèsimes d'unitat, ja que en cas contrari apareixen nombrosos punts per a les quals l'energia cinètica pren un valor excessiu. Per altra banda i mirant la definició anterior de la funció de guia, sembla raonable prendre per a a un valor de partida $a^2 = (\Psi_F^{op})^2$, i al voltant d'ell ajustar experimentalment el valor.

El mètode més eficaç per a optimitzar aquesta parella de valors ha estat primer optimitzar individualment la constant a i després assajar el càlcul amb diferents valors del paràmetre τ .

La manera de trobar el valor d' a ha estat modificar el programa de càlcul per tal d'obtenir el valor del determinant en diverses configuracions adquirides pel sistema al llarg de la seva evolució. De la col·lecció de valors obtinguts se n'ha calculat un valor promig, que ha quedat establert en l'ordre 10^{32} .

Per a trobar el valor òptim de la constant τ s'ha analitzat tant l'energia com la variància d'una col·lecció fixada de configuracions per a diferents valors del paràmetre. Dels resultats s'ha estimat que el valor òptim està situat entre $\tau = 0.006$ i $\tau = 0.01$.

Les dificultats per obtenir els valors òptims dels paràmetres i els resultats obtinguts indiquen que aquesta modificació de la funció Jastrow introdueix unes correccions molt

petites a l'energia. Els càlculs sobre aquest sistema convergeixen molt lentament cap a un valor estable de l'energia, i per a obtenir una bona qualitat en els resultats s'ha fet necessari duplicar la longitud de les sèries respecte a la resta de càlculs precedents.

A la següent taula s'hi resumeixen els valors d'energia obtinguts amb el model de Jastrow modificat i la funció de guia. S'ha fet una àmplia exploració de les constants, reflectint en la taula els millors resultats aconseguits.

τ	energia (K)
0.0	-1.636±0.014
0.006	-1.717±0.022
0.010	-1.739±0.022
0.014	-1.716±0.018
0.020	-1.572±0.043

Taula 9.1

Millors resultats aconseguits amb la funció de Jastrow modificada i funció de guia. Compari's aquests resultats amb el millor obtingut amb backflow: -2.03 K

Els resultats indiquen que aquesta via d'optimització de la funció d'ona, almenys fins al punt en que ha estat estudiada, no aporta cap millora significativa als resultats. En canvi dificulta considerablement la construcció del programa i augmenta notablement el temps de càlcul numèric.